

УДК 517.96 :537.534.3

## АЛГОРИТМ ПОЛУЧЕНИЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ ТОЧНОСТИ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ РАСЧЕТАХ ЭЛЕМЕНТОВ ЭЛЕКТРОННО- И ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ПРИБОРОВ, ИМЕЮЩИХ ПЛОСКУЮ СИММЕТРИЮ

© 1995г. С.И.Шевченко

*Институт Аналитического Приборостроения РАН, Санкт-Петербург*

Поступила в редакцию 23.01.97

Анализируются причины, приводящие к потере точности в электростатических расчетах элементов электронно- и ионно-оптических приборов, имеющих плоскую симметрию. Формулируется алгоритм, позволяющий учесть эти причины и уменьшить их вклад в ошибку расчетов.

### Введение

В ряде задач, связанных с созданием аналитических электронно- и ионно-оптических приборов, возникает задача получения не просто хороших, а предельных параметров. При расчете или моделировании таких приборов требуется проводить вычисления с предельно высокой точностью. Поэтому задача вычисления электростатического поля, которая лежит в основе расчета характеристик электронно- или ионно-оптических приборов, требует получения предельной точности параметров электростатических полей.

Ниже в качестве метода решения задачи вычисления электростатического поля рассматривается метод граничных интегральных уравнений, как имеющий существенные преимущества перед методами сеток и конечных элементов [1]. Математически задача расчета электростатического поля формулируется как задача Дирихле для уравнения Лапласа. Метод решения этой задачи основан на возможности перехода от уравнения Лапласа к эквивалентному интегральному уравнению [2]:

$$\varphi(\vec{r}_i) = \int_{(S)} \sigma(\vec{r}_i) G(\vec{r}, \vec{r}_i) dS, \quad (1)$$

где интегрирование проводится по всей граничной поверхности  $S$ ,  $\vec{r} \in S$ ,  $\sigma(\vec{r})$  – функция плотности поверхностного заряда (ППЗ),  $G(\vec{r}, \vec{r}_i)$  – ядро интегрального уравнения. Точка  $\vec{r}_i$ , в которой ищется потенциал, называется точкой наблюдения.

В рассматриваемом в данной работе случае плоской симметрии интеграл в (1) по площади границы  $S$  переходит в интеграл по контуру  $L$  сечения границы плоскостью. При решении электростатических задач контур границы  $L$ , как правило, делят на части, соответствующие электродам, которые, в свою очередь, подразделяют на отрезки, представимые прямой линией или гладкой кривой. Тогда граничное интегральное уравнение принимает вид:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}_i) &= \sum_{p=1}^{N_p} \varphi_p(\vec{r}_i) = \\ &= \sum_{p=1}^{N_p} \int_0^{d_p} \sigma(\ell) G(\vec{r}, \vec{r}_i) d\ell, \end{aligned} \quad (2)$$

где суммирование проводится по всем отрезкам электродов, а интегрирование – по длине контура каждого отрезка электрода,  $\varphi_p(\vec{r}_i)$  – вклад в полный потенциал от одного отрезка,  $N_p$  – число отрезков границы,  $d_p$  – длина каждого отрезка (ниже будем обозначать ее

просто  $d$ ).

Нахождение потенциала  $\varphi(\vec{r}_i)$  и компонент напряженности электрического поля  $E^{(x)}, E^{(y)}$  осуществляется в два этапа:

1. На первом этапе функция плотности поверхностного заряда  $\sigma(\ell)$  считается неизвестной. Уравнение (1) решается методом коллокации, т.е. записывается в точках границы  $S$ , причем левая часть считается известной из граничных условий, а правая часть записывается в виде численной квадратуры наивысшей алгебраической точности (метод Гаусса) ([3]). В результате получается система линейных алгебраических уравнений относительно значений  $\sigma(\ell)$  в точках — узлах гауссового интегрирования (точках коллокации). Эта система уравнений определяет массив значений  $\sigma(\ell)$  в точках границы.

2. На втором этапе найденная ранее функция плотности поверхностного заряда  $\sigma(\ell)$  подставляется в выражение (1), проводится численное интегрирование правой части и получается значение потенциала в любой точке.

На каждом этапе могут возникать ошибки вычисления: на первом и втором этапе — при расчете интеграла (2) и на первом этапе — при решении системы алгебраических уравнений.

Точность решения системы алгебраических уравнений зависит от метода решения. В данной работе использован метод исключения Гаусса с выбором ведущего элемента. Вопрос о точности решения полученной системы алгебраических уравнений в данной работе обсуждаться не будет, так как этот вопрос достаточно отражен в литературе ([4]).

Обоснованность и точность решения уравнения Лапласа методом граничных интегральных уравнений определяется обоснованностью применения метода гауссовского численного интегрирования к выражению (2). Для применимости такого метода необходимо, чтобы подынтегральная функция была достаточно гладкой: для замены интеграла в (2) гауссовской квадратурой порядка  $N$  ( $N$  — число точек, в которых берется подынтегральная функция, и членов в сумме) необходима непрерывность подынтегральной функции вместе с ее производными вплоть до порядка  $(2N - 1)$  [3].

Непрерывность или достаточная гладкость подынтегральной функции в (2) может быть нарушена, если она нарушена для одной из составляющих функций ( $\sigma$  или  $G$ ):

1. Ядро интегрального уравнения  $G(\vec{r}, \vec{r}_i)$  может не быть непрерывным или достаточно гладким в следующих случаях:

а. Если точка наблюдения принадлежит отрезку контура границы, по которому идет интегрирование. В этом случае ядро имеет сингулярность в точке коллокации, совпадающей с точкой наблюдения.

б. Если точка наблюдения принадлежит отрезку контура границы, расположенному достаточно близко от отрезка границы, по которому идет интегрирование. В этом случае, например для прямолинейного отрезка интегрирования, ядро может быть представлено в виде  $G(\vec{r}, \vec{r}_i) = -0.5 \ln \sqrt{(\ell - \ell_i)^2 + \delta^2}$ . Это ядро не имеет сингулярности, но при достаточно малых величинах  $\delta$  ведет себя негладко (имеет экстремум настолько резкий, что значительная его часть может попасть между двумя точками коллокации). Очевидно, что такой вид интегрируемой функции не допускает прямого применения гауссовских квадратур.

2. Плотность поверхностного заряда может иметь сингулярность или негладкость, если контур интегрирования имеет излом или конец.

В представленной работе мы остановимся на возможностях нарушения гладкости интегрируемой в (2) функции, связанных с поведением ядра, и опишем методы получения решения высокой точности.

Если условия непрерывности или достаточной гладкости подынтегральной функции в (2) не выполнены, то переход в правой части уравнения (2) к гауссовой сумме не является законным. Частично обойти эту трудность можно с помощью описанного в [3] метода понижения особенности интегрируемой функции. В известных нам работах [1,5,6] при использовании метода понижения особенности интегрируемой в (2) функции использовалось добавление и вычитание значения функции плотности в точке коллокации, совпадающей с точкой наблюдения, при условии, что точка наблюдения находится на отрезке границы, по которому проводится интегрирование. При этом полной обоснованности применения гауссовской квадратуры еще нет, т.к. сингулярность появляется в первой производной новой интегрируемой функции.

В [7] для трехмерной геометрии применялся квадратичный полином, т.е. сингулярность появлялась в производной второго порядка.

Очевидно, что основной путь повышения

точности расчетов как на первом, так и на втором этапе решения задачи Дирихле, — это увеличение степени гладкости функции, подвергаемой численному интегрированию.

В данной работе мы опишем один из возможных методов повышения гладкости функции, подвергаемой численному интегрированию.

### 1 Ядро интегрального уравнения

Ядро интегрального уравнения (2) в случае плоской задачи Дирихле определяется (с точностью до коэффициента) выражением (см напр. [2]):

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}_i) &= -\ln |\vec{r} - \vec{r}_i| = \\ &= -0,5 \ln(L^{(2)}), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $L^{(2)}$  — квадрат длины отрезка, соединяющего точки  $\vec{r}$  и  $\vec{r}_i$  контура границы.

Заметим, что интегрирование в (2) ведется вдоль контура границы (по  $d\ell$ ), а в ядре (3) содержится разность  $\vec{r} - \vec{r}_i$ , поэтому удобнее представить ядро зависящим от длины контура границы. Для этого рассмотрим функцию:

$$\begin{aligned} L^{(2)} &= (|\vec{r} - \vec{r}_i|)^2 = \\ &= (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $(x, y)$  — координаты точки  $\vec{r}$ ,  $(x_i, y_i)$  — координаты точки  $\vec{r}_i$ .

Будем считать возможным представление отрезков контура границы в виде прямых линий, частей окружности и в виде гладкой кривой, задаваемой координатами точек, через которые она проходит.

1. Если отрезок интегрирования является прямолинейным, то функция  $L^{(2)}$  представима в виде:

$$L^{(2)} = \xi^2 + \delta^2, \quad (5)$$

где  $\xi = \ell - \ell_i$ ,  $\ell_i$  — расстояние от начала отрезка интегрирования до точки — проекции точки наблюдения на отрезок интегрирования,  $\ell$  — расстояние от начала отрезка интегрирования до точки интегрирования,  $\delta$  — расстояние от точки наблюдения до отрезка границы.

Видно, что когда точка наблюдения принадлежит отрезку интегрирования, то ядро

становится сингулярным (логарифмическая сингулярность). Если точка наблюдения не принадлежит отрезку интегрирования, но расстояние  $\delta$  от точки наблюдения до отрезка границы, по которому идет интегрирование, мало, то ядро является функцией с резким максимумом.

2. Если точка интегрирования  $\vec{r}$  принадлежит части окружности, то для функции  $L^{(2)}$  легко получить:

$$L^{(2)} = 2R(R - \delta)(1 - \cos \alpha) + \delta^2, \quad (6)$$

где  $R$  — радиус окружности отрезка границы,  $\alpha = \xi/R$ .

Видно, что интеграл (2) с ядром (3), в котором функция  $L^{(2)}$  представлена выражением (6), не относится к числу аналитически интегрируемых. Чтобы получить в (2) аналитически интегрируемое выражение, следует получить некоторый полином, интерполирующий (6). В принципе, можно разложить (6) в ряд по  $\xi$  и ограничиться несколькими первыми членами. Можно, с другой стороны, построить для (6) интерполирующий полином, проходящий через некоторое количество  $N_i$  базовых точек. Мы выбрали второй подход (обоснование которого будет ясно из дальнейшего материала):

$$L_{N_i}^{(2)} = \sum_{i=1}^{N_i} h_i \xi^{i-1}. \quad (7)$$

3. Если интегрирование ведется вдоль некоторой гладкой кривой, вид которой задается координатами точек, то для построения искомого интерполяционного полинома следует сперва построить интерполяцию координат в зависимости от длины контура рассматриваемого отрезка границы. Затем определяются значения расстояния  $L^{(2)}$  от точки наблюдения до точек отрезка границы, выбранных в качестве базовых (шаблон) для интерполяции. В заключение по значениям  $L^{(2)}$  и соответствующей длины контура  $d$  строится интерполяционный полином, по внешнему виду ни чем не отличающийся от (7).

Рассмотрим выражение (7) для интерполяционного полинома. Если гладкая кривая или окружность, представляющие отрезок границы, имеют малую кривизну (радиус закругления  $R \rightarrow \infty$ ), то рассматриваемый

мый отрезок границы можно считать практически прямолинейным, а значит вид интерполирующего полинома  $L_{N_i}^{(2)}$  будет практически совпадать с выражением (5). Т.е. при  $\delta \neq 0$  этот полином имеет два комплексно-сопряженных корня  $\ell_{1,2} = \ell_i \pm i\delta$ , а остальные корни расположены достаточно далеко от этих двух корней. Поэтому вполне допустимо представление полинома (7) в виде

$$L_{N_i}^{(2)} = [(\ell - \ell_0)^2 + \delta^2] \cdot P_{N_i-2}(\xi), \quad (8)$$

где  $P_{N_i-2}(\xi)$  – полином порядка  $N_i - 3$ , причем его корни совпадают с оставшимися  $N_i - 3$  корнями полинома (7). Поэтому полином  $P_{N_i-2}(\xi)$  представляет собой гладкую функцию. Следовательно, для этой функции вполне допустимо численное интегрирование методом Гаусса.

Для нахождения "главных" комплексно-сопряженных корней полинома (7), ответственных за поведение ядра в области резкого его изменения, можно использовать как метод Берстоу [8], так и комплексный аналог метода Ньютона [8]. Нами были использованы оба этих метода.

## 2 Формирование матрицы коэффициентов

Первый этап решения уравнения Лапласа состоит в формировании матрицы коэффициентов и последующем численном решении матричного уравнения. Для вклада в потенциал от одного отрезка электрода (один член в сумме (2)) имеем выражение:

$$\varphi_p(\vec{r}_i) = \int_0^d \sigma(\ell) G(\vec{r}, \vec{r}_i) d\ell \quad (9)$$

Для интегрируемого выражения в (9) возможны два случая: когда ядро гладкое и когда ядро нельзя считать гладким.

Если ядро имеет гладкий характер, что возможно когда отрезок не содержит точку наблюдения  $\vec{r}_i$  или расположен достаточно далеко от этой точки, то в формуле (9) допустим прямой переход к квадратурной сумме по правилу Гаусса [3]:

$$\varphi_p(\vec{r}_i) = d \sum_{k=1}^N A_k \sigma(\ell_k) G_{i,k}, \quad (10)$$

где  $\ell_k$  – узлы и  $A_k$  – коэффициенты квадратуры Гаусса,  $G_{i,k} = G(\vec{r}_i, \vec{r}_k)$ .

Если рассматриваемый отрезок границы содержит точку наблюдения  $\vec{r}_i$  или расположен в непосредственной близости от этой точки, то ядро представляет собой функцию, имеющую или сингулярность или резкий максимум. Вполне очевидно, что, если ядро имеет настолько резкий максимум, что существенная часть его может попасть между двумя узлами гауссовой, то переход от интеграла (2) к численной квадратуре (10) не является законным.

Частично обойти эту трудность удастся с помощью метода понижения степени особенности подинтегральной функции [3].

Представим функцию плотности поверхностного заряда в виде интерполяционного полинома по  $N_i$  точкам, в котором коэффициенты при значениях  $\sigma$  в базовых точках разложены по степеням  $\xi$ :

$$\sigma_{N_i}(x) = \sum_{i=1}^{N_i} \sigma_{m(i)} \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j} \xi^{j-1}. \quad (11)$$

где  $m(i)$  – массив номеров точек коллокации, принадлежащих отрезку контура границы, по которому идет интегрирование, используемых в качестве базовых точек интерполирования и являющихся ближайшими к точке – проекции точки наблюдения на рассматриваемый отрезок. Такого представление можно получить, например, проведя интерполяцию по Лагранжу [9] и разложив затем коэффициенты при значениях  $\sigma$  по степеням  $\xi$ . Мы, однако, применили процедуру прямого разложения  $\sigma$  в ряд (см. Приложение).

Проведем в выражении (9) процедуру понижения особенности интегрируемой функции:

$$\begin{aligned} \varphi_p(\vec{r}_i) = & -0.5 \int_0^d [\sigma(\ell) \ln(L^{(2)}) - \\ & - \sigma_{N_i}(\ell) \ln(L_{N_i}^{(2)})] d\ell - \\ & - 0.5 \int_0^d \sigma_{N_i}(\ell) \ln(L_{N_i}^{(2)}) d\ell. \end{aligned} \quad (12)$$

Функция, стоящая под знаком первого интеграла, является гладкой вместе со своими

производными до  $(N_i - 1)$ -ой включительно. Поэтому первый интеграл в (12) можно взять численным методом, используя квадратурное правило Гаусса:

$$J_1 = d \sum_{k \notin m(i)}^N A_k \sigma(\xi_k) G_{i,k} + \sum_{i=1}^{N_i} \sigma_{m(i)} \left\{ 0.5 d \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j} S_j^{(1)} \right\}, \quad (13)$$

где

$$S_j^{(1)} = \sum_{k \notin m(i)}^N A_k \xi_k^{j-1} \ln(L_{N_i}^{(2)}(\xi_k)).$$

Здесь становится ясным ответ на вопрос, который остался не рассмотренным при выводе формулы (7). Если выражение в правой части (6) разложить в ряд по  $\xi$ , то члены в квадратурной сумме первого интеграла (12), имеющие номера  $k \in m(i)$  не будут равны нулю. Если же для  $L_{N_i}^{(2)}$  строить интерполирующий полином (7) по  $N_i$  точкам, то все эти члены будут равны нулю.

Второй интеграл в (12) после подстановки в него выражения (11) принимает вид:

$$J_2 = -0.5 \sum_{i=1}^{N_i} \sigma_{m(i)} \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j} \beta_j, \quad (14)$$

где

$$\beta_j = \int_{-A_n}^{B_n} \xi^{j-1} \ln(L_{N_i}^{(2)}) d\xi, \\ A_n = \ell_i, B_n = d - \ell_i.$$

Если отрезок интегрирования является прямолинейным, то полином  $L_{N_i}^{(2)}$  имеет вид (5), и интегралы в правой части (14), после подстановки в них выражения (5), принимают вид, допускающий простое аналитическое интегрирование.

Если отрезок интегрирования является или дугой окружности или гладкой кривой, то интегралы в правой части (14) уже не являются аналитически интегрируемыми, однако в этом случае возможно воспользоваться формулой (8) и выводами из нее. Именно, подставим в интеграл в правой части (14) формулу (5) и получим

$$\beta_j = \int_{-A_n}^{B_n} \xi^{j-1} \ln[\xi^2 + \delta^2] d\xi + \int_{-A_n}^{B_n} \xi^{j-1} \ln[P_{N_i-2}(\xi)] d\xi. \quad (15)$$

Первый интеграл в (15) имеет уже знакомый нам вид и особых затруднений не вызывает, а второй интеграл содержит под знаком интеграла произведение гладких функций, поэтому может быть представлен в виде квадратуры Гаусса.

Из выражения (12) после подстановки в него формул (13) - (15) и выделения выражений, при значениях плотности поверхностного заряда в точках коллокации  $\sigma_k$ , получают коэффициенты матрицы:

$$\begin{aligned} \text{Если } k \notin m_i : & \quad c_{i,k} = d A_k G_{i,k}, \\ \text{Если } k \in m_i : & \quad c_{i,k} = \\ & \quad 0,5 \sum_{j=1}^{N_i} \{ d S_j^{(1)} - \beta_j \} \tau_{i,j}. \end{aligned}$$

Решение полученного матричного уравнения относительно неизвестных значений плотности поверхностного заряда  $\sigma_i$  в точках коллокации осуществлялось методом исключения Гаусса с выбором ведущего элемента.

Т.о. в результате проведенного в выражении (2) преобразования, в члене, к которому применяется квадратура Гаусса, удалось перейти от функции, имеющей или логарифмическую сингулярность или весьма резкий пик, к функции, непрерывной вплоть до  $N_i - 1$  производной или являющейся достаточно гладкой.

Применяемый в данной работе метод является обобщением метода, используемого в опубликованных ранее работах, и может рассматриваться как реализация общего метода понижения степени особенности подынтегральной функции (см. [3]) в случае интеграла с логарифмическим ядром.

### 3 Вычисление потенциала электрического поля

Для вычисления потенциала электростатического поля используется выражение (2),

в котором функция плотности поверхностного заряда  $\sigma$  уже является известной, поэтому для ее интерполяции применяется формула:

$$\sigma_{N_i}(\xi) = \sum_{j=1}^{N_i} \varrho_j \xi^{j-1}, \quad (16)$$

где  $\varrho_j$  – соответствующие коэффициенты интерполяции.

Для расстояний, достаточно далеких от отрезка поверхности элемента границы, по которому идет интегрирование, интегрируемая функция в (9) не содержит точек сингулярности и поэтому, считая гладкость ее достаточной, интеграл в (9) можно заменить квадратурной суммой Гаусса:

$$\varphi_p(\vec{r}_i) = d \sum_{k=1}^{N_i} A_k \sigma(\ell_k) G_{i,k}. \quad (17)$$

И далее вклады от отдельных отрезков суммируются и получается потенциал в точке наблюдения  $\vec{r}_i$ .

Если точка наблюдения  $\vec{r}_i$  находится вблизи или непосредственно на поверхности элемента границы, по поверхности которого осуществляется интегрирование, то интегрируемая функция в (9) или является недостаточно гладкой, или содержит точку сингулярности. В этом случае следует применить процедуру понижения особенности интегрируемой функции [3], что приведет к формуле (12), в которой возможен, хотя и недостаточно обоснован, переход к численной квадратуре Гаусса, в результате чего получается:

$$\begin{aligned} \varphi_p(\vec{r}_i) = & -0,5 d S^{(0)} + \\ & + 0,5 \sum_{j=1}^{N_i} \varrho_j \{d S_j^{(1)} - \beta_j\}, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} S^{(0)} &= \sum_{k \notin m(i)}^{N_i} A_k \sigma_k G_{k,i}, \\ S_j^{(1)} &= \sum_{k \notin m(i)}^{N_i} A_k \xi_k^{j-1} \ln(L_{N_i}^{(2)}(\xi_k)), \end{aligned}$$

$$\beta_j = \int_{-A_n}^{B_n} \xi^{j-1} \ln(L_{N_i}^{(2)}(\xi)) d\xi$$

Процесс вычисления  $S^{(0)}$  и  $S_j^{(1)}$ , также как и в п.2., каких-либо сложностей не встречает, т.к. и  $G_{i,k}$  и  $L_{N_i}^{(2)}$  вычисляются просто. Вычисление интегралов  $\beta_j$ , в которых сам вид подынтегральной функции зависит от конфигурации отрезка границы, по которому идет интегрирование, уже было рассмотрено выше.

#### 4 Вычисление компонент напряженности электрического поля

Особенности вычисления компонент напряженности электрического поля рассмотрим на примере компоненты  $E^{(x)}$ . Вклад в  $E^{(x)}$  от одного отрезка границы определяется дифференцированием выражения (3) по  $\vec{r}_i$  ( $\vec{E} = -\nabla\varphi$ ), что приводит к выражению:

$$E_p^{(x)}(\vec{r}_i) = - \int_0^d \sigma(\ell) G^{(x)}(\vec{r}, \vec{r}_i) d\ell, \quad (19)$$

в котором соответствующая функция Грина получается из (3) простым дифференцированием по  $x_i$ :

$$\begin{aligned} G^{(x)}(\vec{r}, \vec{r}_i) &= \frac{x - x_i}{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2} = \\ &= \frac{x - x_i}{L^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Выражения для  $E^{(y)}$  и  $G^{(y)}$  вполне аналогичны формулам (19) и (20).

Очевидно, что для точек наблюдения  $\vec{r}_i$ , расположенных достаточно далеко от отрезка контура границы, по которому проводится интегрирование, в формуле (19) можно сразу перейти к численной квадратуре Гаусса:

$$E_p^{(x)}(\vec{r}_i) = d \sum_{k=1}^N A_k \sigma(\ell_k) G_{i,k}^{(x)} \quad (21)$$

Совсем другое дело, когда точка наблю-

дения  $\vec{r}_i$  находится вблизи или непосредственно на поверхности отрезка границы. Тогда под интегралом (19) стоит функция  $1/L^{(2)}$  или сингулярная или недостаточно гладкая для перехода к численной квадратуре Гаусса. Чтобы перейти в (19) к численной квадратуре Гаусса, следует применить процедуру понижения особенности интегрируемой функции [3]. Однако, предварительно необходимо все функции, стоящие под интегралом в (19), представить как функции от переменной  $\xi = \ell - \ell_i$ . Для этого проведем интерполяцию функции, стоящей в числителе ядра (20):

$$x - x_i = \sum_{i=1}^{N_i} g_i \xi^{i-1}, \quad (22)$$

а для интерполяции функции  $L^{(2)}$ , находящейся в знаменателе ядра (20), используем или выражение (5) или интерполяционный полином (8).

Применяя методiku понижения особенности интегрируемой функции [3], получим для вклада в компоненту напряженности электрического поля от одного отрезка границы:

$$E_p^{(x)}(\vec{r}_i) = d \cdot S^{(0)} + d \cdot S^{(1)} - \sum_{j=1}^{N_i} \varrho_j \sum_{i=1}^{N_i} g_j \gamma_{j+i-2}, \quad (23)$$

где

$$S^{(0)} = \sum_{k \notin m(i)}^N A_k \sigma_k G^{(x)}(\ell_k),$$

$$S^{(1)} = \sum_{i=1}^{N_i} \varrho_i \sum_{k \notin m(i)}^N A_k \xi_k^{i-1} G_{N_i}^{(x)}(\ell_k),$$

$$\gamma_k = \int_{-A_n}^{B_n} \xi^k \frac{d\xi}{(\xi^2 + \delta^2) \cdot P_{N_i-2}(\xi)}.$$

Видно, что для прямолинейного отрезка интегрирования ( $P_{N_i-2}(\xi) = 1$ ) интегралы  $\gamma_k$  являются аналитически интегрируемыми.

Для непрямолинейного отрезка интегрирования корни полинома  $P_{N_i-2}(\xi)$  находятся далеко от отрезка интегрирования и этот

полином и функцию  $1/P_{N_i-2}(\xi)$  можно считать гладкими на отрезке интегрирования. Это дает возможность провести для функции  $(x - x_i)/P_{N_i-2}(\xi)$  разложение, подобное (22)

$$\frac{x - x_i}{P_{N_i-2}(\xi)} = \sum_{i=1}^{N_i} g'_i \xi^{i-1}, \quad (24)$$

Если подставить это выражение в последний член формулы (22), то получим

$$\sum_{j=1}^{N_i} \varrho_j \sum_{i=1}^{N_i} g'_j \cdot \gamma_{j+i-2}, \quad (25)$$

где интеграл  $\gamma_k$  полностью совпадает с тем, что уже был ранее рассмотрен.

Собираем все вместе и получаем в результате выражение для вклада в компоненту напряженности  $E_p^{(x)}$  от одного отрезка границы.

### Результаты и обсуждение

Особенностью приведенного алгоритма является то, что при вычислении электростатического поля имеется возможность выбирать порядок интерполяции  $N_i - 1$ . При этом верхним пределом повышения точности результата может быть то, что пределом интерполяции и, стало быть, пределом гладкости квадратуемой функции является порядок численной квадратуры (точнее говоря, всегда выполняется соотношение  $N_i - 1 \leq N - 1$ ).

Приведенный выше алгоритм был реализован в виде программ, включенных в очередную версию пакета прикладных программ "Shift" ([10]). Т.к. в приведенной работе не рассматривались особенности поверхностного заряда, связанные с концами и изломами границы, то описанный алгоритм предназначен, главным образом, для решения задач в областях с контуром границы без изломов и концов. Это возможно, если все сопряжения участков границы гладкие и все углы скруглены.

Развитый в данной работе алгоритм позволяет избавиться от пиков ППЗ, связанных с присутствием близких и соседних отрезков границы.

В качестве тестовых примеров (задач)

можно использовать задачи, которые имеют аналитическое решение, например цилиндрический конденсатор или конденсатор со сфероидальными электродами.

Для тестовой задачи "цилиндрический конденсатор" удалось получить плотность поверхностного заряда и  $(\varphi, E^{(x)}, E^{(y)})$  с относительным отклонением от теоретических значений порядка  $n \cdot 10^{-6}$ .

Таким образом, в результате проделанной работы удалось определить причины, приводящие к появлению значительных погрешностей вычисления, и разработать алгоритм, учитывающий эти причины и позволяющий значительно повысить точность вычислений.

### Приложение.

Нахождение коэффициентов интерполяции полинома  $L_{N_i}^{(2)}$

Выбрав в качестве шаблона несколько  $(N_i)$  точек из массива, задающего точки контура, зная длину контура от начала данного отрезка до каждой точки шаблона, и используя эту длину в качестве базового массива, запишем  $L_{N_i}^{(2)}$ :

$$L_{N_i}^{(2)} = \sum_{i=1}^{N_i} h_i (\ell - \ell_i)^{i-1},$$

В левую часть последнего выражения подставляем (4), в котором в качестве  $(x_0, y_0)$  взяты координаты точки наблюдения, а в качестве  $(x, y)$  взяты координаты точек базового массива. Тогда получившееся уравнение можно рассматривать как систему уравнений для определения коэффициентов  $h_i$ . Эта система решается с помощью процедуры исключения Гаусса с выбором ведущего элемента и в результате получают коэффициенты  $h_i$ .

### Литература

1. *Иванов В.Я.* Методы автоматизированного проектирования приборов электроники. Новосибирск, 1986, 193 с.
2. *Соболев С.Л.* Уравнения математической физики. М., 1966.
3. *Крылов В.И., Шульгина Л.Т.* Справочная книга по численному интегрированию. М., 1976. 370 с.
4. *Форсайт Дж., Малкольм М., Моулер К.* Машинные методы математических вычислений. М., 1980. 279 с.
5. *Антоненко О.Ф.* Численное решение задачи Дирихле для незамкнутых поверхностей вращения. // Вычислительные системы: Изд-во ИМ СО АН СССР. Новосибирск, 1964. №12. С.39-47.
6. *Ильин В.П.* Численные методы решения задач электрофизики. М., 1985. 336 с.
7. *Фрейкман Б.Г.* Вычисление электрического поля вблизи заряженной поверхности. // ЖТФ. 1979. №11. С. 2464-2472.
8. *Хемминг Р.В.* Численные методы. М., 1968. 400 с.
9. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М., 1970. 720 с.
10. *Шевченко С.И.* Пакет прикладных программ "Shift" для решения уравнений Лапласа и Пуассона // Материала Всес. семинара "Методы расчета электронно-оптических систем". Алма-Ата, 1992. С.11.

## ALGORITHM TO ATTAIN AN UTMOST ACCURACY IN PLANE-SYMMETRIC ELECTROSTATIC ELEMENT CALCULATIONS FOR ELECTRON- AND ION-OPTICAL INSTRUMENTS

S.I. Shevchenko



*Institute for Analytical Instrumentation RAS, Sankt-Petersburg*

The sources of accuracy losses in plane-symmetric electrostatic element calculations for electron- and ion-optical instruments are considered. An algorithm is formulated to take account of those sources and to minimize their contribution to the calculation error.